

ABSTRAK

Metode *docking* molekul telah digunakan untuk memprediksi pemisahan enansiomer pada senyawa *miconazole* dengan menggunakan turunan *cyclodextrin*, seperti *sulfated- β -cyclodextrin* (S- β -CD), *hydroxypropyl- β -cyclodextrin* (HP- β -CD) dan *hydroxypropyl- γ -cyclodextrin* (HP- γ -CD) sebagai selektor kiral. *Docking* molekul dilakukan menggunakan *software Autodock Vina* dan *Root Mean Square Deviation* (RMSD) dihitung menggunakan *software PyMol*. Hasil *docking* menunjukkan bahwa kompleks *R-Miconazole* dengan seluruh turunan *cyclodextrin* lebih stabil dibandingkan *S-Miconazole* berdasarkan energi ikatan kompleks tersebut sehingga *S-Miconazole* akan terelusi terlebih dahulu kemudian *R-Miconazole*. Berdasarkan penelitian, efektivitas turunan *cyclodextrin* sebagai selektor kiral secara berurutan adalah HP- β -CD>S- β -CD>HP- γ -CD.

Kata kunci: *docking molekul, miconazole, turunan cyclodextrin*



ABSTRACT

Molecular docking method has been used to predict enantioseparation of miconazole using cyclodextrin derivatives such as sulfated- β -cyclodextrin (S- β -CD), hydroxypropyl- β -cyclodextrin (HP- β -CD) and hydroxypropyl- γ -cyclodextrin (HP- γ -CD). Molecular docking was performed using Autodock Vina software and Root Mean Square Deviation (RMSD) was calculated using PyMol software. The docking result showed that R-Miconazole with all of cyclodextrin derivatives complexes was more stable compared to S-Miconazole based on the lower binding energy of the complexes, therefore, S-Miconazole will be eluted first followed by R-Miconazole. In addition, the effectiveness of using cyclodextrin derivatives as chiral selectors predicted enantioseparation of miconazole was HP- β -CD>S- β -CD>HP- γ -CD.

Keyword: *molecular docking, miconazole, cyclodextrin derivatives*

